

Васильева Лидия Анатольевна, Кудряшов Марк Дмитриевич, Баязитов Василий Дмитриевич  
**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАЛЬНЫХ ИЗОТЕРМ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ  
ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ**

В данной работе исследуются изотермические процессы, протекающие в реальных газах. Проведено компьютерное моделирование уравнения Ван-дер-Ваальса с использованием известных значений постоянных  $a$  и  $b$  для чистых газов. Модель используется для численных расчетов критических значений температур и изотерм многокомпонентных газовых смесей.

Адрес статьи: [www.gramota.net/materials/1/2013/7/9.html](http://www.gramota.net/materials/1/2013/7/9.html)

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

**Альманах современной науки и образования**

Тамбов: Грамота, 2013. № 7 (74). С. 32-34. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: [www.gramota.net/editions/1.html](http://www.gramota.net/editions/1.html)

Содержание данного номера журнала: [www.gramota.net/materials/1/2013/7/](http://www.gramota.net/materials/1/2013/7/)

**© Издательство "Грамота"**

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: [www.gramota.net](http://www.gramota.net)

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: [almanac@gramota.net](mailto:almanac@gramota.net)

универсальности позволяет использовать данный дескриптор в сочетании с методами *de novo* для поиска соответствий между фиктивным лигандом, пространственно комплементарным сайту связывания белка, и реальными химическими соединениями.

К сожалению, проблемы с используемым сторонним программным обеспечением не позволяют точно определить форму зависимости числа ложноотрицательных прогнозов от длины дескриптора и числа хранимых конформаций. Поэтому основное направление развития метода связано с разработкой собственного или поиском и адаптацией существующего генератора ансамбля конформаций, в достаточной мере предоставляющего управление параметрами получения конформаций, в частности шириной диапазона потенциальной энергии, возможностью получения заданного числа конформаций напрямую или через оценку среднеквадратичного отклонения межатомных расстояний.

#### Список литературы

1. Bloom B. Space/Time Tradeoffs in Hash Coding with Allowable Errors // Communications of the ACM. 1970. Vol. 13. P. 422-426.
2. Broder A., Mitzenmacher M. Network Applications of Bloom Filters: a Survey // Internet Mathematics. 2004. № 1 (4). P. 485-509.
3. Hopfinger A., Wang S., Tokarski J., Jin B., Albuquerque M., Madhav P., Duraiswami C. Construction of 3D-QSAR Models Using the 4D-QSAR Analysis Formalism // Journal of the American Chemical Society. 1997. Vol. 119. P. 10509-10524.
4. Koes D. R., Camacho C. J. Pharmer: Efficient and Exact Pharmacophore Search // Journal of Chemical Information and Modeling. 2011. Vol. 51. P. 1307-1314.
5. Stranneheim H., Kaller M., Allander T., Andersson B., Arvestad L., Lundeberg J. Classification of DNA Sequences Using Bloom Filters // Bioinformatics. 2010. № 26 (13). P. 1595-1600.
6. Vainio M. J., Johnson M. S. Generating Conformer Ensembles Using a Multiobjective Genetic Algorithm // Journal of Chemical Information and Modeling. 2007. Vol. 47. P. 2462-2474.

УДК 536-3

#### Физико-математические науки

*В данной работе исследуются изотермические процессы, протекающие в реальных газах. Проведено компьютерное моделирование уравнения Ван-дер-Ваальса с использованием известных значений постоянных  $a$  и  $b$  для чистых газов. Модель используется для численных расчетов критических значений температур и изотерм многокомпонентных газовых смесей.*

*Ключевые слова и фразы:* реальные газы; *Mathcad*; уравнение Ван-дер-Ваальса; смеси реальных газов; изотермы реальных газов; углеводороды.

**Васильева Лидия Анатольевна**, к. ф.-м. н.

**Кудряшов Марк Дмитриевич**

**Баязитов Василий Дмитриевич**

*Волгоградский государственный архитектурно-строительный университет*

*bayazitov.vgasu@mail.ru*

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАЛЬНЫХ ИЗОТЕРМ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ<sup>©</sup>

Широкое применение природного газа требует его тщательного изучения. Изучение поведения газа в изотермическом процессе актуально в связи с необходимостью сжижения газа для его транспортировки.

Если для чистых газов условия сжижения известны, то для смесей разных составов требуется расчёт постоянных в уравнении Ван-дер-Ваальса и критических значений температуры и давления. Проведен анализ теоретических моделей для построения изотерм реальных газов и выбрана компьютерная модель изотермических процессов с применением двухконстантного уравнения состояния Ван-дер-Ваальса для реальных газов:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

Главное достоинство уравнения Ван-дер-Ваальса состоит не только в том, что оно описывает газовую фазу вещества в более широкой области температур и давления, но и в том, что оно описывает картину превращения газа в жидкость при температурах ниже критической.

Видно, что это уравнение фактически является уравнением состояния идеального газа с двумя поправками. Поправка  $a$  учитывает силы притяжения между молекулами (давление на стенку уменьшается, так как

есть силы, втягивающие молекулы приграничного слоя внутрь), поправка  $b$  – учетверенный собственный объем молекул газа.

Для объяснения процесса сжижения рассмотрим зависимости давления от объема при постоянной температуре (изотермы).

Выразив давление из уравнения, получим:

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

Для смесей параметры  $a$  и  $b$  являются функцией их состава [1]:

$$a = \sum_{i=1}^N (x_i \sqrt[3]{a_i})^3 \quad b = \sum_{i=1}^N (x_i \sqrt[3]{b_i})^3,$$

где  $x_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента в смеси,

$N$  – число компонентов в смеси,

$a_i$  и  $b_i$  – константы для уравнения Ван-дер-Ваальса  $i$ -го компонента смеси.

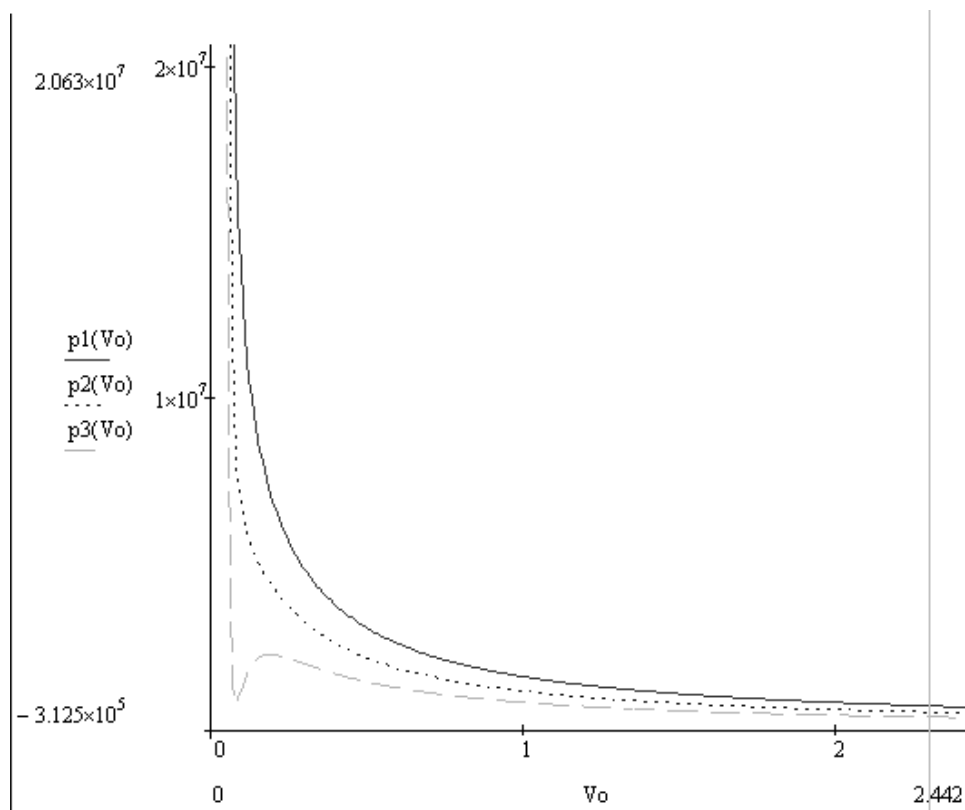
Моделирование проводилось в системе «Mathcad». Основная сложность заключалась в том, чтобы подобрать область исследования, в которой описывается процесс сжижения. Постоянные коэффициенты  $a_i$  и  $b_i$  для компонентов смесей были взяты из справочной литературы. Значения критических температур для смесей вычислялись по известной формуле:

$$T_{\text{крит}} = \frac{8a}{27bR}$$

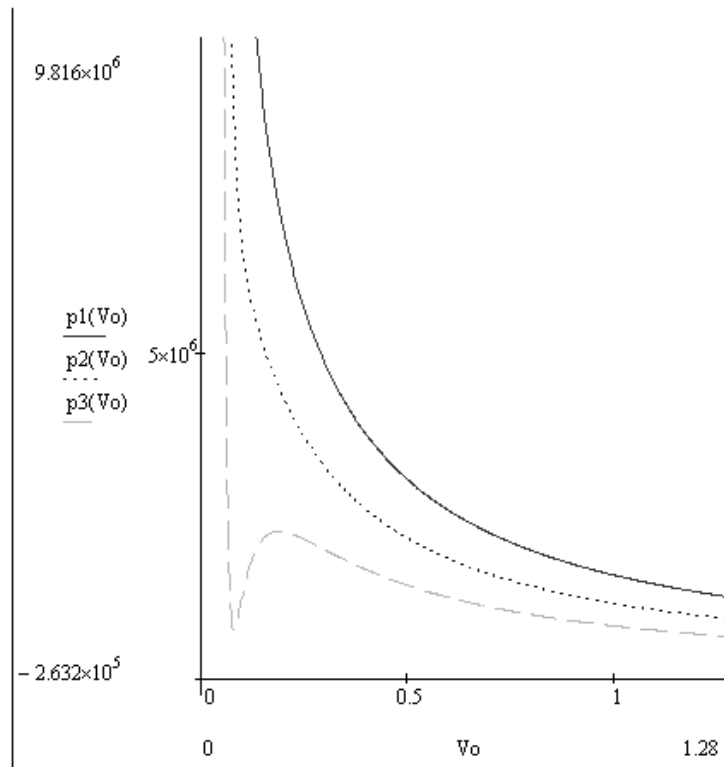
Полученные значения использовались для построения критической изотермы, для остальных графиков значения температуры подбирались соответственно выше и ниже критической. При температуре выше критической газ вообще не превращается в жидкость, сжижение невозможно. При температуре, равной критической, на графике имеется точка перегиба, критическая точка, где стираются различия между жидкостью и газом. При температуре ниже критической на графике изотермического процесса имеется волнообразный участок, где происходит сжижение газа.

Ниже приведены результаты компьютерного моделирования изотермических процессов в смесях реальных газов, добываемых в нефтегазовой промышленности, в виде графиков реальных изотерм.

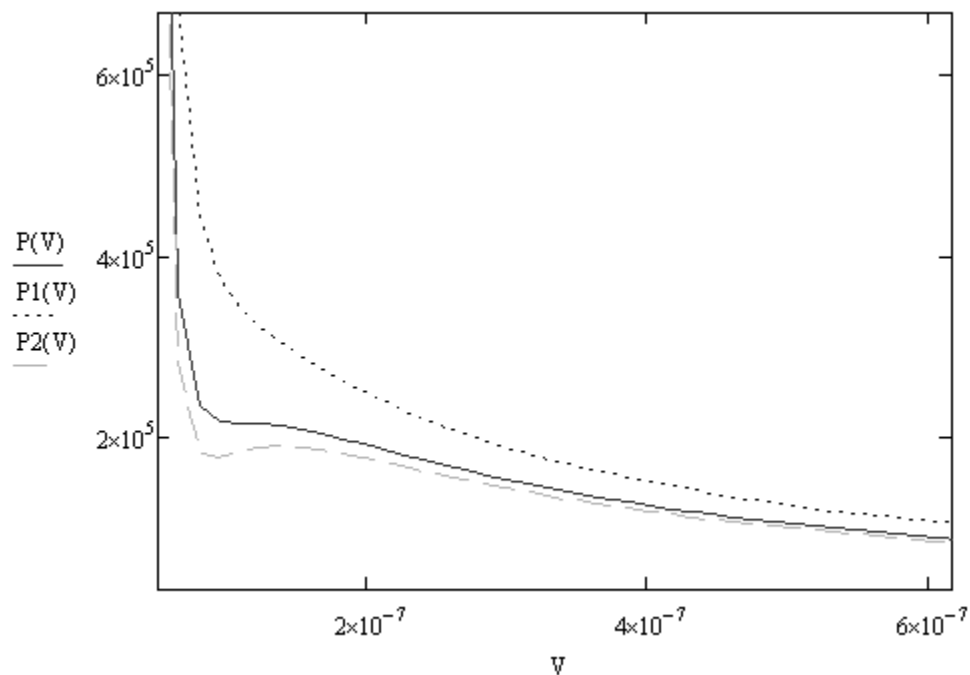
На Рисунках 1-3 показаны графики изотермических процессов для смесей реальных газов. Газы взяты в равных концентрациях. Графики приведены для трех значений температур – ниже критической, равной критической и выше критической. Все примеры приведены в расчёте на один моль смеси.



**Рис. 1.** Изотермы для смеси газов гелия и водорода в равных концентрациях при температурах ниже критической 137 К (нижняя), равной критической 150 К (средняя) и выше критической 16 К (верхняя)



**Рис. 2.** Изотермы для смеси газов азота и водорода в равных концентрациях при температурах ниже критической 110 К (нижняя), равной критической 125 К (средняя) и выше критической 135 К (верхняя)



**Рис. 3.** Изотермы для смеси газов бутана и пропана в равных концентрациях при температурах ниже критической 70 К (нижняя), равной критической 76 К (средняя) и выше критической 87 К (верхняя)

При отсутствии трубопроводов для транспортировки газов необходимо использовать сжижение. Данная работа позволяет оценить условия, при которых возможен этот процесс. Погрешность оценок составляет 10-15% [Там же].

#### Список литературы

1. Добыча, подготовка и транспорт природного газа и конденсата: справочное руководство: в 2-х т. / под ред. Ю. П. Коротяева, Р. Д. Маргулова. М.: Недра, 1984. Т. I.